제4장 양자역학의 체계 II

4.1 연산자 수식체계 (Operator formalism)

앞장에서 우리는 단순 조화 떨개 문제 등을 통하여 연산자를 사용하여 어떻게 양자역학의 문제를 다룰 수 있는지 보았다. 이제 이 장에서는 이러한 연산자와 디락의 브라-켓 표현을 써서 양자역학의 주요 특성들을 살펴보고자 한다.

• 에르미트 연산자의 고유값과 고유상태
(Hermitian operator and its eigenvalues and eigenstates)

에르미트 연산자는 자기수반 연산자로 2장에서 소개한 바 있다. 즉, 연산자 A의 수반 연산자 $A^\dagger$가 임의의 두 상태 $|\phi>$, $|\psi>$ 에 대해 다음과 같이 정의되었으므로 $<A^\dagger\psi|\phi> := <\psi|A\phi>$, 자기수반 연산자인 에르미트 연산자는 항상 다음 식을 만족한다: $<A\psi|\phi> = <\psi|A\phi>$. 우리는 이러한 특성을 써서 지금부터 에르미트 연산자의 고유값과 고유상태가 갖는 특성을 알아보자.

■ 첫째, 에르미트 연산자의 고유값은 실수이다.

이를 알아보기 위하여 고유값 a를 갖는 고유상태 $|\phi>$ 즉, $A|\phi> = a|\phi>$ 임을 가정하자. 그러면 고유상태 $|\phi>$ 에 대한 A의 기댓값은 다음과 같이 주어진다.

$<\phi|A|\phi> = <\phi|a|\phi> = a<\phi|\phi> = a$.

그런데 자기수반 연산자의 정의를 쓰면 다음과 같이 쓸 수 있으므로,

$<\phi|A|\phi> = <A\phi|\phi> = <a\phi|\phi> = a^*<\phi|\phi> = a^*$,

$a = a^*$ 가 되어 a는 실수값을 갖는다. 즉, 모든 에르미트 연산자의 고유값은 실수이다.

■ 둘째, 서로 다른 고유값을 갖는 에르미트 연산자의 고유상태들은 서로 직교한다.

이를 알아 보기 위하여 서로 다른 고유값 a_1, a_2 를 갖는 고유상태 $|\phi_1>$, $|\phi_2>$ 즉, $A|\phi_1> = a_1|\phi_1>$, $A|\phi_2> = a_2|\phi_2>$ 의 관계식을 가정한다. 그러면 다음 관계식을 만족한다. $<\phi_2|A|\phi_1> = a_1<\phi_2|\phi_1>$

그런데 A는 자기수반 연산자이므로 위식은 다음과 같이도 쓸 수 있다.

$<\phi_2|A|\phi_1> = <A\phi_2|\phi_1> = <a_2\phi_2|\phi_1> = a_2{}^*<\phi_2|\phi_1> = a_2<\phi_2|\phi_1>$

즉, $a_1<\phi_2|\phi_1> = a_2<\phi_2|\phi_1>$ 에서 $(a_1 - a_2)<\phi_2|\phi_1> = 0$ 을 만족하여야 하므로 $a_1 \neq a_2$이면 $<\phi_2|\phi_1> = 0$이 되어야 한다. 즉, 에르미트 연산자의 서로 다른 고유값을 갖는 고유상태들은 서로 직교한다.

• 가환 연산자들과 공통의 고유상태
(commuting operators and common eigenstates)

양자역학에서 주어진 물리계의 서로 가환하는 연산자들을 찾는 것은 매우 중요하다. 왜냐하면, 이 가환 연산자들은 서로 공통의 고유상태를 가지기 때문에 각 연산자의 고유값은 주어

진 고유상태를 서로 다르게 특징지어 주기 때문이다. 때문에 주어진 물리계에서 서로 가환하는 모든 연산자들의 집합(a complete set of commuting operators)은 주어진 물리계의 힐베르트 공간을 정의하는데 필수적이다. 이제 서로 가환하는 연산자들이 왜 공통의 고유상태를 갖는지 살펴보기 위하여 가환하는 두 연산자 A, B를 가정하자: $[A,B]=0$. 그리고 고유값 a를 갖는 연산자 A의 고유상태 ϕ를 가정하자: $A\,|\,\phi> \;= a\,|\,\phi>$. 그러면, 두 연산자의 가환조건에서 다음과 같이 쓸 수 있다.

$AB\,|\,\phi> \;= BA\,|\,\phi> \;= aB\,|\,\phi>$

그런데 연산자 B가 ϕ에 작용한 상태를 새로운 상태 ψ로 표현하면, $B\,|\,\phi> \;:= \;|\,\psi>$, 위식은 $A\,|\,\psi> \;= a\,|\,\psi>$ 로 쓸 수 있다. 즉, 새로운 상태 ψ 역시 A의 고유상태이며 고유값은 ϕ 와 같은 a를 갖는다. 즉, 두 상태 ϕ, ψ 는 서로 동등하며, $\phi \sim \psi$, 이때 비례상수를 b라고 하면 다음과 같이 쓸 수 있다.

$|\,\psi> \;= B\,|\,\phi> \;= b\,|\,\phi>$

이는 A의 고유상태 ϕ가 B의 고유상태이고, 그 고유값은 비례상수 b임을 보여준다.

즉, 가환하는 두 연산자는 서로 공통의 고유상태를 가짐을 보여준다. 이 경우 고유상태 ϕ는 두 개의 고유값 a, b로 구분되므로 이를 표시하기 위하여 고유상태 ϕ를 ϕ_{ab}로 표시하여 각 연산자의 고유값을 함께 알 수 있도록 한다.

즉, $[A,B]=0$ 이면, $A\,|\,\phi_{ab}> \;= a\,|\,\phi_{ab}>$, $B\,|\,\phi_{ab}> \;= b\,|\,\phi_{ab}>$.

► 가환 연산자들과 겹침상태 ◄

어떤 연산자에 대해 동일한 고유값을 갖는 서로 다른 고유상태들을 우리는 겹침상태들(degenerate states) 이라고 한다. 즉, $A\,|\,\phi> \;= a\,|\,\phi>$, $A\,|\,\psi> \;= a\,|\,\psi>$ 이면 우리는 두 상태 ϕ, ψ 가 서로 겹쳐있다고 한다. 그런데 이러한 겹침상태들은 위에서 살펴본 가환 연산자들의 공통의 고유상태 관계에 어떠한 변화를 주는지 살펴보기로 하자.

먼저 A의 두 겹침상태들의 선형결합을 생각하면, $c_1\,|\,\phi> + c_2\,|\,\psi> \;:= \;|\,\chi>$ (c_1, c_2는 임의의 상수), 이 새로운 상태 $|\,\chi>$ 역시 동일한 고유값 a 를 갖는 A의 고유상태임을 알 수 있다. 여기서 새로운 연산자 B가 연산자 A와 가환이라면, $[A,B]=0$, 위에서처럼 다음의 관계식이 성립한다.

$AB\,|\,\phi> \;= BA\,|\,\phi> \;= aB\,|\,\phi>$

즉, $B\,|\,\phi>$ 는 고유값 a를 갖는 A의 고유상태이다. 그런데, 위에서 본 것처럼 A의 겹침상태들의 임의의 선형결합인 $|\,\chi>$ 역시 고유값 a를 갖는 A의 고유상태이므로 우리는 일반적으로 $B\,|\,\phi>$ 가 $|\,\chi>$ 에 비례한다고 할 수 있다. 즉, $B\,|\,\phi> \;\sim \;|\,\chi>$ 로 쓸 수 있으므로, 그 비례상수를 b로 표현하면 다음과 같이 쓸 수 있다.

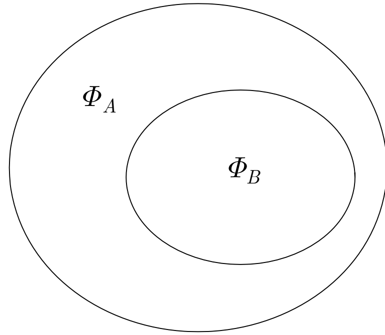
$B\,|\,\phi> \;= b(\,c_1\,|\,\phi> + c_2\,|\,\psi>) \;\neq b\,|\,\phi>$

즉, A의 고유상태 ϕ가 B의 고유상태가 되지 않을 수 있음을 보여준다. 이는 A의 고유상태 ψ의 경우에도 마찬가지이다.

한편, B가 겹침상태를 갖지 않는다면, B의 고유상태는 항상 A의 고유상태가 됨을 다음과 같이 볼 수 있다. 일단 $B\,|\,\xi> \;= b\,|\,\xi>$ 라고 가정하면, $[A,B]=0$ 에서

$BA\,|\,\xi> \;= AB\,|\,\xi> \;= b\,A\,|\,\xi>$ 이 되어 고유값 b를 갖는 (겹침이 없는) B의 고유상

태는 항상 상태 ξ 와 동등하여야 한다. 즉, $A \mid \xi > \ \sim \ \mid \xi >$ 가 되어 $A \mid \xi > \ = a' \mid \xi >$ 로 쓸 수 있다. 즉, 겹침이 없는 B 의 고유상태 ξ 는 항상 A 의 고유상태가 된다.
이를 도표로 표현하면 [그림4.1]과 같다. 즉, 두 연산자가 가환일 때, 겹침이 있는 연산자는 겹침이 없는 연산자에 비해 더 많은 고유상태를 갖는다.



[그림4.1] 두 연산자 A, B 가 가환 ($[A,B]=0$) 일 때, 연산자 A 가 겹침상태를 갖고, 연산자 B 는 겹침상태를 갖지 않는 경우의 두 연산자의 고유상태들의 관계. 여기서 Φ_A , Φ_B 는 각각 연산자 A, B 의 고유상태들의 집합을 표시.

• 수반 연산자들의 예

우리는 2장에서 $< c\,\psi \mid \ = c^* < \psi \mid$ (c 는 상수) 라고 하였고, 위에서도 이 관계를 사용하였다. 그리고 복소수의 수반 연산자는 공액복소수(complex conjugate)라고 하였다. 먼저 복소수의 수반 연산자가 왜 공액복소수로 주어지는지 살펴보기 위하여 다음의 디락 브라-켓을 생각해 보자.

$$< \psi \mid c\phi > \ = \ < c^\dagger \psi \mid \phi >$$

일단 위식에서 좌변은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$< \psi \mid c\phi > \ = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* \, c\, \phi \ = c\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* \phi = c < \psi \mid \phi >$$

그리고 우변은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$< c^\dagger \psi \mid \phi > \ = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, (c^\dagger \psi)^* \phi = \ (c^\dagger)^* \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* \phi \ = \ (c^\dagger)^* < \psi \mid \phi >$$

그러므로 $c = (c^\dagger)^*$ 가 되어야 한다. 즉, $c^\dagger = c^*$ 이다.
이제 이 결과와 두 번째 식을 사용하면 맨 위식은 다음과 같이 다시 쓸 수 있다.
$< \psi \mid c\phi > \ = \ < c^* \psi \mid \phi > \ = c < \psi \mid \phi >$
여기서 두 번째 등호가 성립하려면 $< c^* \psi \mid \ = c < \psi \mid$ 가 성립되어야 한다. 즉, $< c\,\psi \mid \ = c^* < \psi \mid$ 가 되어야 한다.
두 번째로 두 연산자 A, B 의 곱으로 된 연산자 AB 의 수반 연산자 $(AB)^\dagger$ 는 어떻게 주어질까? 이를 알아보기 위하여 마찬가지로 다음의 디락 브라-켓을 생각하자.

$< \psi \mid AB \mid \phi > \; = \; < (AB)^{\dagger}\psi \mid \phi >$

여기서 좌변은 $B \mid \phi > \; := \; \mid \chi >$ 로 놓으면 $< \psi \mid A \mid \chi > \; = \; < A^{\dagger}\psi \mid \chi >$ 로 쓸 수 있고, 이는 다시 $< A^{\dagger}\psi \mid \chi > \; = \; < A^{\dagger}\psi \mid B \mid \phi > \; = \; < B^{\dagger}A^{\dagger}\psi \mid \phi >$ 로 쓸 수 있다.

즉, $(AB)^{\dagger} = B^{\dagger}A^{\dagger}$ 임을 알 수 있다.

마지막으로 미분연산자 $D := \frac{d}{dx}$ 의 수반 연산자 $D^{\dagger}$ 는 무엇일까? 다음의 디락 브라-켓에서, $< \psi \mid D \mid \phi > \; = \; < D^{\dagger}\psi \mid \phi >$, 좌변은 다음과 같이 주어진다.

$$< \psi \mid D \mid \phi > \; = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* \frac{d}{dx}\phi = \psi^*\phi \mid_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{d\psi^*}{dx}\phi$$

여기서 $< \psi \mid \phi >$ 가 유한한 값을 가지려면, 맨 우변의 첫 번째 항은 영이 되어야 한다.

즉, $< \psi \mid D \mid \phi > \; = \; - \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{d\psi^*}{dx}\phi = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, (-\frac{d\psi}{dx})^*\phi$ 가 된다.

이는 $< D^{\dagger}\psi \mid \phi >$ 와 같아야 하므로, $D^{\dagger}\psi = -\frac{d\psi}{dx}$, 즉 $D^{\dagger} = -\frac{d}{dx}$ 이다.

위에서 얻은 두 결과를 함께 적용하면 우리는 운동량 연산자 $p = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ 가 에르미트 연산자 즉 자기수반 연산자임을 곧 확인할 수 있다.

$p^{\dagger} = \left(\frac{d}{dx}\right)^{\dagger}\left(\frac{\hbar}{i}\right)^{\dagger} = -\frac{\hbar}{i}\left(\frac{d}{dx}\right)^{\dagger} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} = p$.

여기서 $\left(\frac{\hbar}{i}\right)^{\dagger} = -\frac{\hbar}{i}$ 는 상수이므로 연산자 $\left(\frac{d}{dx}\right)^{\dagger}$ 와 가환임을 사용하였다.
